

1. Hentschel G. Mayenit, $12\text{CaO} \cdot 7\text{Al}_2\text{O}_3$, und Brownmillerit, $2\text{CaO} \cdot (\text{Al}, \text{Fe})_2\text{O}_3$, zwei neue Minerale in den Kalksteineinschlüssen der Lava des Etringer Bellerbergs // Neues Jahrb. Min. Monatsh. 1964. P. 22–29.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 13-03-96118).

СЛОЖНЫЕ ОКСИДЫ $\text{Ba}_{1-x}\text{Me}_x\text{FeO}_{3-\delta}$ (Me=Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Ho): КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И КИСЛОРОДНАЯ НЕСТЕХИОМЕТРИЯ

Дерябина К.М., Волкова Н.Е., Гаврилова Л.Я.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Перовскитоподобные оксиды на основе редкоземельных элементов и 3d-переходных металлов обладают уникальным комплексом физико-химических свойств. В связи с этим они являются перспективными материалами для использования в различных электро-химических устройствах. Учитывая актуальность данной проблемы, перед настоящей работой была поставлена следующая цель: изучить кристаллическую структуру и кислородную нестехиометрию сложнооксидных фаз общего состава $\text{Ba}_{1-x}\text{Me}_x\text{FeO}_{3-\delta}$ (Me=Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Ho)

Сложные оксиды состава $\text{Ba}_{1-x}\text{Me}_x\text{FeO}_{3-\delta}$, где $x=0.25 - 0.45$ были синтезированы по глицерин-нитратной технологии на воздухе и в средах с пониженным парциальным давлением кислорода. Заключительный отжиг проводили при 1100 °С с последующим медленным охлаждением до комнатной температуры. Фазовый состав полученных оксидов определяли рентгенографически. Определение параметров элементарных ячеек осуществляли с использованием программы «CelRef 4.0», уточнение кристаллической структуры – методом полнопрофильного анализа Ритвелда в программе «FullProf 2008».

По данным РФА установлено, что образцы $\text{Ba}_{1-x}\text{Me}_x\text{FeO}_{3-\delta}$ (Me= Pr, Nd) на воздухе являются однофазными в интервале составов $0.3 \leq x \leq 0.4$, а для Me = Sm, Eu, Gd, Ho образуется единственное соединение с $x = 0.375$. Рентгенограммы всех однофазных оксидов были проиндексированы в рамках кубической ячейки пространственной группы $Pm\bar{3}m$. Для всех однофазных оксидов из рентгенографических данных рассчитаны параметры элементарной ячейки и координаты атомов. С уменьшением концентрации бария и с увеличением радиуса лантанида параметры элементарной ячейки растут, что связано с размерным эффектом.

Оксиды состава $\text{Ba}_{0.6}\text{Me}_{0.4}\text{FeO}_{3-\delta}$ ($\text{Me} = \text{Sm}, \text{Eu}, \text{Gd}, \text{Ho}$) были получены однофазными при температуре 1000 °С и пониженном парциальном давлении кислорода (10^{-3} - 10^{-7} атм). Рентгенограммы образцов были проиндексированы в рамках кубической ячейки пространственной группы $Pm\bar{3}m$.

Для всех однофазных образцов методом термогравиметрического анализа (ТГА) была изучена кислородная нестехиометрия (δ) как функция температуры (в интервале 25 – 1100 °С) на воздухе. Абсолютное значение кислородного дефицита определяли методом йодометрического титрования. Показано, что индекс кислородной нестехиометрии δ увеличивается с ростом температуры и уменьшением радиуса лантанида.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 13-03-00958 а

РАЗРАБОТКА ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО КАЛОРИМЕТРА

Седнев А.Л., Цветков Д.С.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Большое количество современных исследований посвящено материалам, которые используются в топливных элементах. Одним из условий применения данных веществ является их химическая инертность по отношению друг к другу, особенно если они эксплуатируются при высоких температурах. Общеизвестным фактом является то, что для оценки химической активности материала необходимо иметь информацию о его термодинамических характеристиках, таких как $\Delta H_{\text{обр}}$, Ср , ΔG . Метод калориметрии позволяет найти данные величины.

Таким образом, целью нашей работы является разработка калориметра, позволяющего проводить измерения при высоких температурах.

Основной принцип работы разработанного нами калориметра заключается в следующем: измеряемое вещество, находящееся при комнатной температуре, помещается в реакционный тигель, нагретый до заданной температуры и окруженный спаями термобатарей, которая измеряет разность тепловых потоков между тиглем с веществом и тиглем сравнения, находящимся под ним и заполненным инертным веществом (шамотом). При помощи вольтметра Agilent 3458А детектируется изменение напряжения термобатарей с течением времени, вызванное разностью тепловых потоков в каждом из тиглей.